

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24年 6月 5日現在

機関番号：82110

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2009～2011

課題番号：21740303

研究課題名（和文）強レーザー場中にある多電子ダイナミクスの第一原理シミュレーション

研究課題名（英文） First-principle calculation for electron dynamics under an intense laser field

## 研究代表者

乙部 智仁 (OTOBE TOMOHITO)

独立行政法人日本原子力研究開発機構・量子ビーム応用研究部門・研究職

研究者番号：60421442

研究成果の概要（和文）：高強度超短パルスレーザー中にある電子のダイナミクスを第一原理から記述する為に時間依存 Kohn-Sham (TDKS) 方程式を実時間実空間法を用いて解く事でシミュレートした。その結果、高次高調波発生やコヒーレントフォノン等非線形なダイナミクスや動的 Franz-Keldysh 効果の記述に成功した。さらに電子励起の影響で変化するレーザー場を記述する為に Maxwell 方程式と TDKS 方程式を融合した多階層シミュレーション手法を開発した。

研究成果の概要（英文）：We solve the time-dependent Kohn-Sham equation with real-space and -time method to describe the electron dynamics under an intense short pulse lasers. We found our method can describe the high-harmonic generation, coherent phonon, and dynamic Franz-Keldysh effect qualitatively. We also developed new multi-scale simulation method to study the laser field affected by the non-linear electron dynamics.

## 交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2010年度	500,000	150,000	650,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	2,600,000	780,000	3,380,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理、原子・分子・量子エレクトロニクス

キーワード：量子エレクトロニクス

## 1. 研究開始当初の背景

多電子系とレーザーの相互作用は主に1電子近似や解析的手法を用いて研究がされてきている。しかしより複雑な系のダイナミクスや多体効果の影響に対する研究は始まったばかりであり、未知の部分が多くある。

特に固体（固体表面）の非線形電子ダイナミクスは世界でも申請者のみが第一原理的に扱っているのみでありこれからの発展が

必要不可欠であった。

## 2. 研究の目的

レーザー場中にある固体及び分子の非線形な多電子ダイナミクスをシミュレートすることでレーザーによる電子励起過程の統一的理解を目指す。また多電子ダイナミクス

を第一原理的に記述する手法としての時間依存密度汎関数法の可能性と限界を明らかにする

### 3. 研究の方法

(1) 時間依存密度汎関数法 (TDDFT) の基礎方程式である時間依存 Kohn-Sham (TDKS) 方程式を実時間実空間法で解くことで、電子ダイナミクスをシミュレートする。

(2) (1) の方法を発展させ、Maxwell 方程式と TDKS 方程式を融合した多階層シミュレーション。

### 4. 研究成果

(1) 固体内部での高次高調波発生の特性とレーザーパラメータ依存性の解明

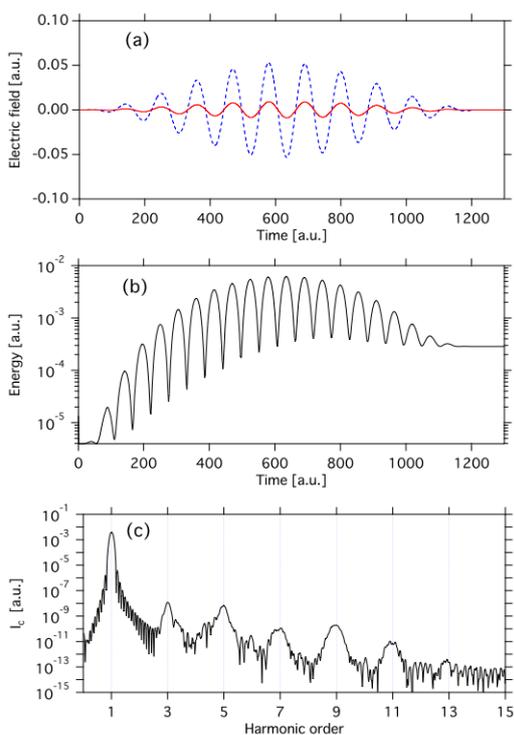


図 1 (a)入射電場と誘起された内部電場、(b) 電子によるエネルギー吸収量、(c)高次高調波スペクトル。レーザー強度は  $1 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>、波長は 800nm とした。

高次高調波発生は電子の非線形ダイナミクスの結果現れる現象であり、電子ダイナミクスの理解だけでなる新奇な光源としても重要である。代表者は TDKS 方程式を用いた実時間計算によりダイヤモンド中での高次

高調波発生過程をシミュレートした。

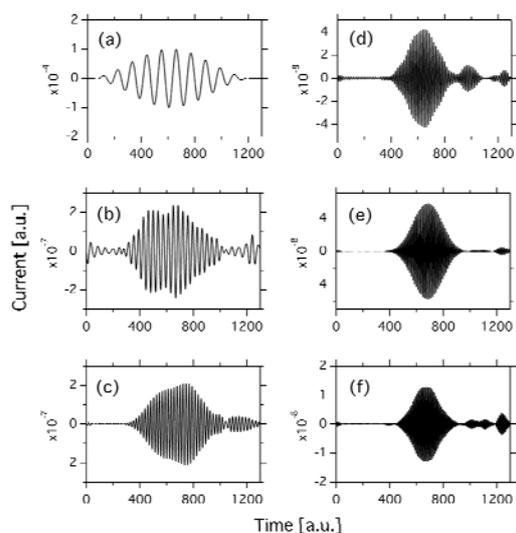


図 2 逆フーリエ変換による各高調波の波形。(a) 1次(b)3次(c)5次(d)7次(e)9次(f) 11次である。

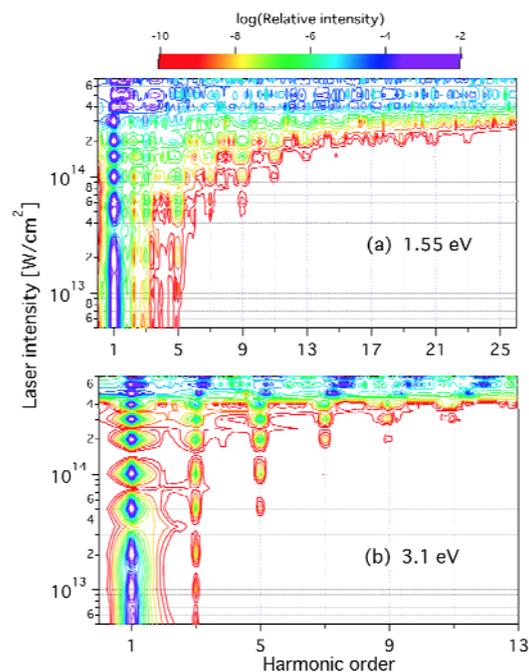


図 3 波長(a)800nm 及び(b)400nm のレーザーによる高次高調波のレーザー強度依存性

図 1 に計算の結果の一例を示した。図 1 (a) レーザー電場 (青) とダイヤモンド内部の電場 (赤)、(b) 電子によるエネルギー吸収量、(c) 電子流密度のフーリエ変換による高次

高調波スペクトルである。図1(c)のエネルギー領域を区切った逆フーリエ変換により各高調波の波形が分かる。その結果を図2に示した。図2(a)1次、(b)3次、(c)5次、(d)7次、(e)9次、(f)11次である。図2から高次高調波は基本波(図2(a))に比べて数分の1の時間幅を持った超短パルスVUV光となっていることが分かる。

図3に(a)波長800nmと(b)波長400nmのレーザーに対する高次高調波のレーザー強度依存性を示した。あるレーザー強度以上では基本波の青方変位が見られ、高調波のスペクトルも大きく変化することが明らかとなった。この特徴的なレーザー強度はレーザーによる光絶縁破壊の閾値と一致することも明らかとした。

(2) 中赤外光による動的 Franz-Keldysh 効果の記述

レーザーによるバンド構造の歪みに起因する動的 Franz-Keldysh 効果の第一原理計算に成功した。この成果を発展させることでレーザー電場による超高速光スイッチの実現が期待できる。

(3) 超短パルスレーザーによるコヒーレントフォノン生成過程の解明

シリコン、ダイヤモンド、アンチモンにおける、超短パルスレーザーによる光学フォノンの単一励起(コヒーレントフォノン)の生成過程を第一原理シミュレーションにより初めて明らかにした。その結果、それまで定性的に捉えられていた電子励起過程の違いによるフォノンの位相の違いを定量的に再現することに成功した。

(4) 電子励起による電磁場の変化を記述するための Maxwell 方程式と TDKS 方程式を融合したシミュレーションコードの開発

電子励起が激しく起きる高強度超短パルスレーザーの理解に於いては、電子励起が引き起こす光学応答の変化とレーザー電場の変化が重要となる。本件では電磁場を記述する Maxwell 方程式と電子ダイナミクスを記述する TDKS 方程式を結合させた新しい多階層シミュレーションコードを開発した。またその適応例としてシリコンにおけるプラズマ生成とプラズマ反射のシミュレーションを行い定性的、定量的に良い結果が得られることを確認した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 5 件)

- ① “First-principle description for the high-harmonic generation in a diamond by intense short laser pulse” T. Otobe, J. Appl. Phys. 111, 093112 (2012)
- ② “Time-dependent density functional theory for strong electromagnetic fields in crystalline solids” K. Yabana, T. Sugiyama, Y. Shinohara, T. Otobe, G. F. Bertsch Phys. Rev. B 85, 045134 (2012)
- ③ “First-principle calculations for multiphoton absorption in  $\alpha$ -quartz under intense short laser irradiation” T. Otobe, J. Phys.: Condens. Matter. 22, 384204 (2010)
- ④ “Coherent phonon generation in time-dependent density functional theory” Y. Shinohara, K. Yabana, Y. Kawashita, J.-I. Iwata, T. Otobe, G. F. Bertsch, Phys. Rev. B 82, 155110 (2010)
- ⑤ 「第一原理計算で探るコヒーレントフォノンの生成機構」篠原康、乙部智仁、岩田潤一、矢花一浩、物理学会誌(最近の研究から)出版決定

[学会発表] (計 10 件)

- ① 「ダイヤモンドからの高次高調波の第一原理計算」乙部智仁 応用物理学会 春季大会 (2012)
- ② 「第一原理計算による透明素材中での高次高調波発生」乙部智仁 物理学会 年次大会 (2012)
- ③ 「固体からの高次高調波スペクトルの励起過程による変化の第一原理計算」乙部智仁 物理学会 年次大会 (2011)
- ④ 「超短パルスレーザーによる固体電子励起確率の方向依存性」乙部智仁 物理学会 年次大会 (2010)
- ⑤ 「TDDFT simulation for laser-matter interaction」T. Otobe, 14<sup>th</sup> East Asian Workshop on Chemical Dynamics (EAWCD14) (2010)

その他 5 件

[図書] (計0件)

[産業財産権]

- 出願状況（計0件）
- 取得状況（計0件）

〔その他〕  
ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

乙部 智仁 (OTOBE TOMOHITO)  
独立行政法人日本原子力研究開発機構・  
量子ビーム応用研究部門・研究職  
研究者番号：60421442

### (2) 研究分担者

なし

### (3) 連携研究者

なし